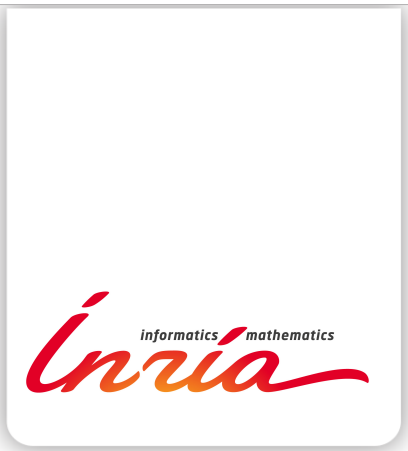
Simul'Elec and PaStiX interface specifications

M. Alaya, M. Faverge, X. Lacoste, A. Péré-laperne, J. Péré-laperne, P. Ramet, T. Terraz

TECHNICAL REPORT
N° 458
April 2015
Project-Team HIEPACS

ISSN 0249-0803 ISRN INRIA/RT--458--FR+ENG



Simul'Elec and PaStiX interface specifications

M. Alaya*, M. Faverge†, X. Lacoste†, A. Péré-laperne*,
J. Péré-laperne*, P. Ramet†, T. Terraz†

Project-Team HIEPACS

Technical Report n° 458 — April 2015 — 19 pages

Abstract: This document presents the interface specification of the electromagnetic modeling module Simul'Elec – from the CAO/DAO tool Pack'ElecBuilder – with the sparse linear system solving library PaStiX.

Key-words: Electromagnetic compatibility, Sparse matrices, sparse solver.

* Algo'Tech Informatique, 20 tue du pont des halles - Technopole Izarbel - Hôtel d'entreprises - 64210 BIDART
† INRIA, 351 cours de la Liberation - F-33405 Talence

RESEARCH CENTRE
BORDEAUX – SUD-OUEST

200 avenue de la Vieille Tour
33405 Talence Cedex

Spécifications de l'interface entre Simul'Elec et PaStiX

Résumé : Ce document présente les spécification de l'interface entre le module de modélisation électromagnétique Simul'Elec, de l'outil de CAO/DAO de circuits électriques Pack'ElecBuilder, et la bibliothèque de résolution de système linéaire creux PaStiX.

Mots-clés : Compatibilité electromagnétique, Matrices creuses, solveur creux.

1 Introduction

Dans le cadre de l'initiative HPC-PME puis du projet Fortissimo, nous avons travaillé à l'intégration des solutions de résolutions de systèmes linéaires creux proposées par Inria Bordeaux - Sud-Ouest. Dans le cadre de nos travaux plusieurs solutions ont été envisagées que nous présenterons ici. Nous avons tout d'abords interfacée la bibliothèque avec le code en Delphi en ajoutant un fichier permettant l'interfaçage au code de Pack'ElecBuilder. Cela nous a permis de remplacer les appels au solveur maison d'Algo'Tech par des appels à notre solveurs. Ensuite, nous avons extrait l'ensemble de la boucle en fréquence de Pack'ElecBuilder pour développer un binaire responsable d'effectuer cette boucle de résolution.

2 Interfaçage de la bibliothèque avec Pack'ElecBuilder

L'interfaçage de PaStiX avec le code Delphi a été assez simple. Après résolution des quelques problèmes de compilation sous Windows, assez limités vu le peu de dépendances de la bibliothèque PaStiX, l'ajout d'un simple fichier Delphi (`S_pastix.pas`, cf. annexe A) au projet décrivant les fonctions utilisées de PaStiX et quelques constantes nous a permis de pouvoir effectuer des appels au solveur d'Inria.

La fonction principale de la bibliothèque PaStiX est décrite dans le Listing 1. Cette fonc-

```
1  procedure z_pastix(pastix_data: Pointer;
                      mpi_comm: Integer;
3                     n: Integer;
                      colptr: TArray<Integer>;
5                     rows: TArray<Integer>;
                      values: TArray<Complexe>;
7                     perm: TArray<Integer>;
                      invp: TArray<Integer>;
9                     rhs: TArray<Complexe>;
                      nrhs: Integer;
11                    iparm: TArray<Integer>;
                      dparm: TArray<Double>);
13                    cdecl; external 'libpastix';
```

Listing 1: Prototype de la fonction principale de PaStiX

tion permet d'effectuer l'ensemble des appels à la bibilothèque: initialisation, prétraitement, factorisation, résolution, raffinement, et libération des données internes.
Seule la version utilisant des complexes double précision est utilisée ici. La variable `pastix_data` correspondant à une adresse mémoire, elle est initialisée à `Null` par l'utilisateur puis PaStiX l'alloue et l'utilisateur doit la conserver afin de la transmettre au différents appels de PaStiX. Elle permet en effet de stocker les différentes données persistantes requise par la bibliothèque.
Le communicateur MPI n'est pas utilisé ici, PaStiX est compilé sans support du MPI sous Windows, un entier de n'importe quelle valeur fera donc l'affaire.
L'entier `n` permet de donner la dimension de la matrice et les tableaux `colptr`, `rows` et `values` permettent de décrire la matrice au format `CSC` (Compress Sparse Column).
Les tableaux `perm` et `invp` décrivent la permutation et permutation inverse calculée par le partitionneur de graphe utilisé par PaStiX (`Scotch` en l'occurrence). L'utilisateur doit les allouer et PaStiX se chargera de les remplir. Dans une utilisation de base, l'utilisateur n'a pas besoin d'y toucher par la suite.
Le vecteur `rhs` contient le second membre de l'équation à résoudre. Il est possible de donner plusieurs second membres en les concaténant dans le vecteur et en indiquant leur nombre avec `nrhs` mais ce ne sera pas le cas ici.
Enfin, les vecteurs `iparm` et `dparm` permettent de contrôler la bibliothèque et d'obtenir des informations sur les résultats. Le premier contient des paramètres entier alors que le second contient des valeurs flottantes en double précision. Les champs de ces vecteurs sont remplis en utilisant les constantes `IPARM_ACCESS` et `DPARM_ACCESS` et peuvent prendre les valeurs décrites par les constantes de type `API_...` décrites par `S_pastix.pas`. Il sera intéressant de compléter et d'intégrer le fichier d'interfaçage vers le Delphi (ou Pascal) à la bibliothèque PaStiX pour permettre un interfaçage de la bibliothèque vers ces langages.

3 Utilisation d'un exécutable dédié au parcours de la boucle en fréquence

Afin de permettre l'utilisation à la fois locale et déportée sur un serveur de calcul, nous avons extrait la boucle de calcul en fréquence de Simul'Elec pour en faire un exécutable.

3.1 Description de l'algorithme

La boucle en fréquence de Simul'Elec effectue une résolution d'un système du type $(\frac{A_1}{j\omega} + A_2 + j\omega A_3)X = B$ avec ω variant avec la fréquence. Tous ces systèmes utilisent la même structure de matrice, seules les valeurs changent. Il sera donc possible de n'effectuer le prétraitement qui consiste en la renumérotation de la matrice et sa factorisation symbolique pour prédire sa structure finale une seule fois. De plus tous ces systèmes sont indépendants, nous pourront donc répartir les résolution sur un ensemble de processeurs sans contrainte.

L'Algorithme 1 décrit la boucle de résolutions.

Algorithm 1: Boucle en fréquence

Data: $A_1, A_2, A_3, X, f_{ini}, f_{fin}, n_{points}$
Result: $S_0 ... S_{n_{point}-1}$
$A := A_1 + A_2 + A_3$;
$preprocess(A)$;
$n_{freq} = \frac{f_{ini} - f_{fin}}{n_{proc}}$;
$my\_f_{ini} = my\_rank \times n\_freq$;
$my\_f_{fin} = my\_f_{ini} + n\_freq - 1$;
for $f \in [\![my\_f_{ini}; my\_f_{fin}]\!]$ **do**
  $\omega = 2\pi f$;
  $A = \frac{A_1}{j\omega} + A_2 + j\omega A_3$;
  $S_f = FactAndSolve(A, X)$;
end

3.1.1 Version itérative

Les résolutions des itérations proches traitant des systèmes très proches numériquement, nous avons estimé judicieux d'utiliser une méthode hybride directe itérative pour accélérer la résolution. En effet, la solution au temps $t + 1$ est très proche de la solution au temps t. Une méthode itérative utilisant comme point de départ la solution du pas précédent convergera donc rapidement. De plus, la matrice, et donc la matrice factorisée, est également proche numériquement d'une itération à l'autre. Nous pouvons alors utiliser la matrice factorisée d'une itération précédente comme préconditionneur pour accélérer la convergence de la méthode itérative. L'algorithme obtenu alors est décrit par l'Algorithme 2.

Il est possible de parametrer la méthode iterative en utilisant le paramètre `IPARM_REF_MODE`:

- Avec la valeur `API_REF_FACT` PaStiX factorise la matrice du système à résoudre et l'utilise comme préconditionneur. Le problème est alors résolu en direct. Si la factorisation n'a pas donné lieu à du pivotage le raffinement ne devrait pas être nécessaire.
- Avec la valeur `API_REF_ONLY` PaStiX n'effectue pas de factorisation, il utilise un raffinement itératif sans préconditionneur.
- Avec la valeur `API_REF_PREC` PaStiX utilise une factorisation calculée lors d'un appel précédent pour préconditionner le raffinement itératif.

Lorsque l'on utilise `API_REF_ONLY` ou `API_REF_PREC`, les étapes de factorisation et de résolution de PaStiX sont utilisée pour fournir respectivement la matrice du système à résoudre et la solution de départ au lieu de leur fonction normale. Ce paramètre est contrôlé dans le binaire `algotech` via les paramètres `-i <precision>` pour activer le raffinement itératif et fournir la précision exigée, et `-w` pour activer le préconditionnement.

Il est également possible de changer l'algorithme de raffinement itératif désiré grâce au paramètre `IPARM_REFINEMENT` qui peut prendre pour valeur:

`IPARM_RAF_GMRES :` algorithme GMRES (Generalized minimal residual);

Algorithm 2: Boucle en fréquence avec méthode hybride direct/iterative

Data: $A_1, A_2, A_3, X, f_{ini}, f_{fin}, n_{points}, precision, max\_iter$
Result: $S_0 ... S_{n_{point}-1}$
$A := A_1 + A_2 + A_3$;
$preprocess(A)$;
$n_{freq} = \frac{f_{ini}-f_{fin}}{n_{proc}}$;
$my\_f_{ini} = my\_rank \times n\_freq$;
$my\_f_{fin} = my\_f_{ini} + n\_freq - 1$;
$need\_fact = true$;
for $f \in [\![my\_f_{ini}; my\_f_{fin}]\!]$ **do**
  $\omega = 2\pi f$;
  $A = \frac{A_1}{j\omega} + A_2 + j\omega A_3$;
  if $need\_fact$ **then**
    $S_f = FactAndSolve(A, X, precision)$;
    $need\_fact = false$;
  else
    $(S_f, n_{iter}) = IterativeSolve(A, X)$;
    if $n_{iter} > max\_iter$ **then**
      $need\_fact = true$;
    end
  end
end

`IPARM_RAF_GRAD :` gradient conjugué (disponible seulement dans le cas symétrique);

`IPARM_RAF_PIVOT :` raffinement itératif simple;

`IPARM_RAF_BICGSTAB :` algorithme BiCGSTAB (Bi-gradient conjugué stabilisé).

L'option `-a <integer>` du binaire algotech permet de choisir l'algorithme itératif: 0 pour le GMRES, 1 pour le gradient conjugué, 2 pour un raffinement itératif simple, et 3 pour le BiCGSTAB.

En fonction de la précision désirée, le solveur itératif effectuera plus ou moins d'itérations et sera plus ou moins rapide. Une valeur permettant d'obtenir des résultats corrects est $2.5e^{-5}$ (Figure 1). Avec une erreur autorisée de $1e^{-2}$ (Figure 2) par contre, les courbes obtenues présentent un profil en marches en escalier.

3.2 Interface

Cette sous-section décrit les entrées et sorties du binaire `algotech` qui est appelé par Pack'ElecBuilder pour résoudre les systèmes linéaires induits par la boucle en fréquence que ce soit pour les calculs locaux ou distants.

3.2.1 Paramètres

Le binaire `algotech` qui fait partie des exemples d'utilisation de la bibliothèque PaStiX propose les options décrites dans le Listing 2.

Une utilisation classique est donnée par la commande suivante : `./algotech -y -t -s 500000000 -e 2000000000 -p 999 -k 0 -o listOutputIdx -u -v 2 -i 2.5e-3 -Constants.mat Capacitance.mat Inductance.mat Rhs.mat`. La matrice est en effet symétrique et elle est traitée en transposée puisque le code de simulation produit des `CSR` d'où le `-y` et le `-t`. La simulation parcoure des fréquences allant de 50 KHz à 2 GHz avec 999 points intermédiaires. L'option de regroupement des solution est désactivée (`-k 0`) elle permet de rassembler les solutions par paquets dans des archives compressées. A l'heure actuelle nous compressons seulement l'ensemble des solutions dans le script de lancement de la commande sur une machine de calcul distante. Cette option n'est pas utilisée en calcul local. Le `-o listInputIdx` indique la position d'un fichier contenant la liste des valeurs dont la simulation en sortie. Ce seront ces valeurs qui seront contenues dans les fichier `sol_<i>.mat`, où `i` est le numéro de la solution, qui seront relues par Simul'Elec. Le fichier `listOutputIdx` est écrit en binaire et contient une liste d'entiers, chacun sur 4 octets. Tout d'abords le nombre d'indices,

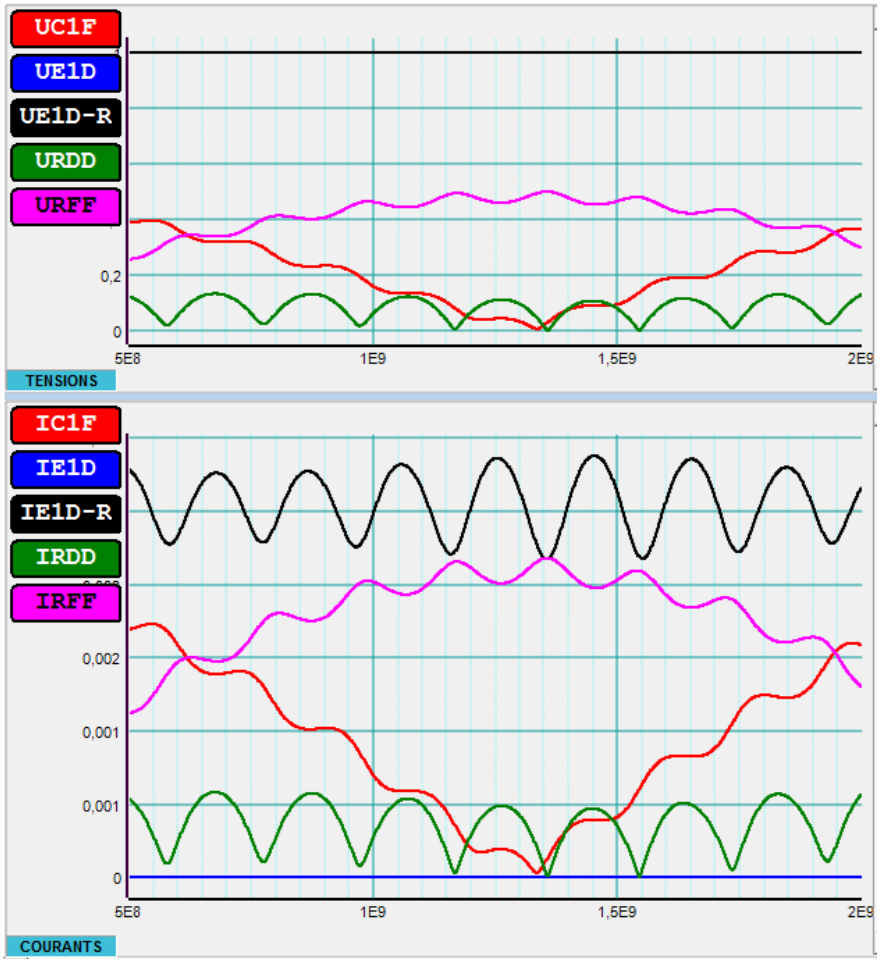


Figure 1: Affichage des résultat avec algorithme incomplet préconditionné utilisant un seuil de $2.5e^{-5}$

```
usage: ./algotech [options] -- matrix1 matrix2 matrix3 rhs
  options : -y              -- If matrix is symmetric
            -x              -- If matrix is hermitian
            -c              -- If check required
            -t              -- If transpose solve
            -l              -- Logarithmic step
            -p <npoints>    -- Number pf points
            -k <packsize>   -- number of solutions in a tar.gz pack
            -s <double>     -- first frequency of the loop
            -e <double>     -- last frequency of the loop
            -v <verbosity>  -- verbosity level
            -r <threadNbr>  -- Number of thread in PaStiX (IPARM_THREAD_NBR)
            -o <filename>   -- binary file containing idx required in outputs
            -u              -- gather all output in one file (only without MPI)
            -i <precision>  -- Activate iterative solve with given precision
            -m <maxiter>    -- when -i is used, factorization is performed when
                               more than maxiter iteration are required,
                               2*maxiter are authorized.
            -a <integer>    -- when -i is used, choose iterative method:
                               0 - GMRES,
                               1 = conjugate gradient,
                               2 = simple iterative refinement,
                               3 = bi-conjugate gradient stabilized
            -w              -- when -i is used, the iterative refinement
                               is performed with a preconditionner
            -h              -- Display this help
```

Listing 2: Option du binaire `algotech`

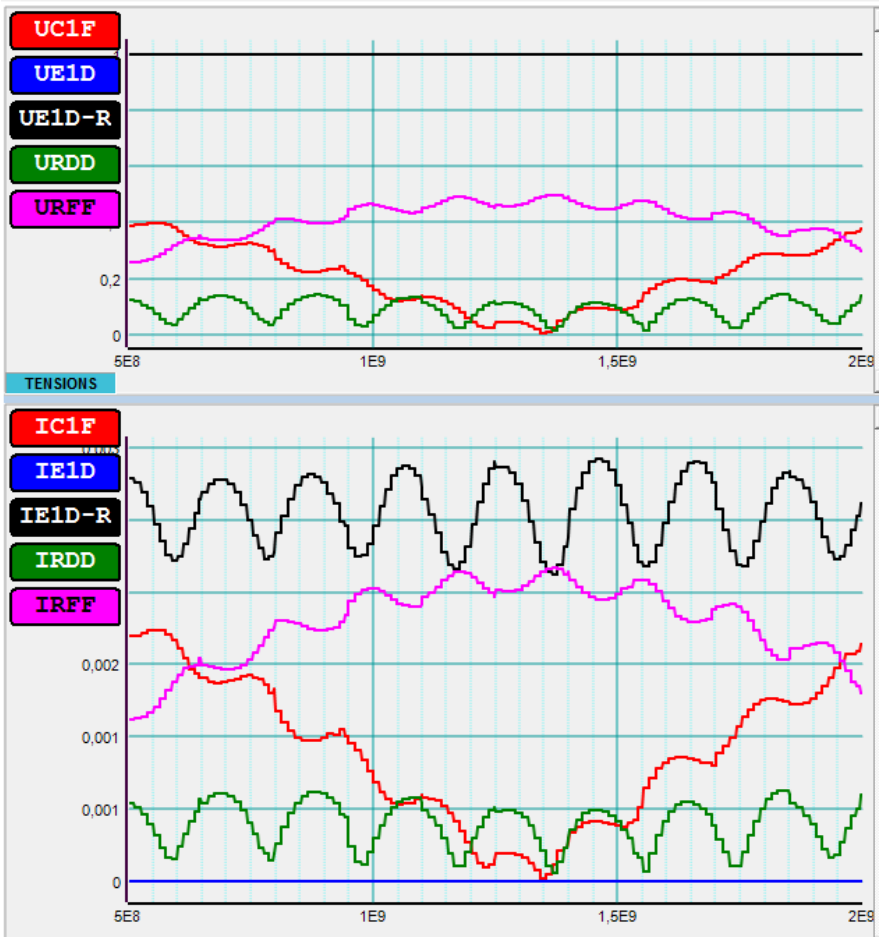


Figure 2: Affichage des résultat avec algorithme incomplet préconditionné utilisant un seuil de $1e^{-2}$

puis les indices en numérotation `C` (i.e. commençant à l'indice 0). L'option `-v` permet de contrôler le niveau de verbosité et l'option `-i <precision>` permet d'activer le mode hybride direct/itératif avec le critère d'arrêt donné pour la partie itérative.

Les matrices sont fournies au format binaire, elles contiennent la matrice au format `CSR` ou `CSC`. Elles commencent par indiquer la taille de la matrice `n`, par un entier sur 4 octet. Puis le tableau `colptr` de taille `n+1` est décrit par autant d'entiers sur 4 octets chacun, numéroté avec la numérotation Fortran (i.e. commençant à l'indice 1). Vient ensuite la liste des colonnes de taille `colptr[n]-1`, en numérotation Fortran. et le tableau des valeurs en double précision sur 8 octets. La première matrice contient les valeurs constantes, la seconde les valeurs en ω et la troisième les valeurs en $\frac{1}{\omega}$.

Le second membre quand à lui ne contient que sa taille suivi de `n` valeur en double complexe sur 16 octets chacune.

3.2.2 Valeurs de retour

Le binaire peut retourner différentes valeurs entières:

0 : Si aucune erreur ne s'est produite;

2 : Si il y a eu un problème de lecture de la matrice ou du second membre;

3 : Si les dimensions des différentes matrices ou du vecteur ne correspondent pas;

4 : Si le format de la matrice est incorrect;

6 : Si la mémoire est insuffisante;

7 : Si la matrice ne valide pas les tests de `pastix_checkMatrix()`;

8 : Si les solutions n'ont pas pu être écrites sur disque;

9 : Si une erreur a été faite dans les options;

10 : Si une erreur a eu lieu pendant le prétraitement;

11 : Si une erreur a eu lieu pendant la factorisation ou la résolution;

12 : Si le fichier contenant la liste des indices à écrire dans les solutions ne peut pas être lu.

Dans le cas d'une exécution distante la sortie est copiée par le script appelant dans un fichier return.txt.

3.3 Appel distants

Les appels au binaire `algotech` peuvent se faire soit en local soit via la plate-forme de calcul extreme-factory. Dans le second cas, l'interfaçage peut être fait de deux manières, soit via l'interface web où l'on peut choisir son application, ses données et ses ressources puis visualiser les résultats, soit via une connexion `SSH` où l'on pourra exécuter la commande `xf_Run` qui soumettra un calcul de manière équivalente à ce que propose l'interface web. C'est ce second modèle que nous utiliserons ici puisqu'il nous permet de nous connecter de manière transparente pour l'utilisateur, toute la partie interface graphique étant fournie par l'application Pack'ElecBuilder.

Ainsi nous utilisons `SSH` par l'intermédiaire de `Putty` pour envoyer nos données (`pscp.exe`), exécuter la commande `xf_Run` (`plink.exe`), et récupérer nos résultats (`pscp.exe`).

La commande `xf_Run` prend pour arguments :

`-s AlgotechPastix :` pour sélectionner l'application à utiliser. Ici, le binaire `algotech`;

`-v <version> :` pour indiquer la version de l'application à utiliser;

`-i <inputDirectory> :` pour indiquer le chemin du dossier contenant les matrices;

`-q compute.q :` pour indiquer la queue au gestionnaire de travaux;

`-n <nodeNbr> :` pour indiquer le nombre de processus MPI;

`-C <threadNbr> :` pour indiquer le nombre de coeurs par processus MPI;

`-j <jobName> :` pour indiquer le nom du job;

`-w hhh:mm:ss :` pour indiquer le temps d'exécution maximal du job;

Ensuite, les options que nous voudrions passer au binaire `algotech` sont précédées par deux tirets : `xf_Run <opts_xf_Run> -- <opts_algotech>`.

4 Conclusion

Ainsi nous avons décrit ici deux solutions pour l'interfaçage de Pack'ElecBuilder avec PaStiX pour pouvoir utiliser la même solution pour les calculs locaux et distants, nous avons décidé d'utiliser la solution permettant le déport de la boucle en temps dans le binaire `algotech`. En effet, cette solution s'adapte à la fois au calcul locaux et distants. C'est donc celle-ci que nous utiliserons. La version `SSH` pourra évoluer dans les mois à venir lorsqu'une interface de programmation aura été proposée par BULL pour permettre de remplacer les connexions `SSH` et de se passer d'outils tels que `Putty`.

A Fichier d'interfaçage avec le Delphi

Le fichier `S_pastix.pas` est le fichier permettant de décrire les fonctions et constantes permettant les appels de la bibliothèque PaStiX depuis le code en Delphi. Il a été construit à partir de `common/src/api.h` de PaStiX et des descriptions de fonctions se trouvant dans `sopalin/src/pastix.h`.

```
unit S_pastix

interface

uses S_recc_ksc ;

const

{ Acces au tableau iparm}
{
   enum: IPARM_ACCESS

   Integer parameters tabular accessors

   IPARM_MODIFY_PARAMETER      - Indicate if parameters have been set by user
                  Default: API_YES              IN
   IPARM_START_TASK            - Indicate the first step to execute (see PaStiX
       steps)    Default: API_TASK_ORDERING   IN
   IPARM_END_TASK              - Indicate the last step to execute (see PaStiX
       steps)     Default: API_TASK_CLEAN      IN
   IPARM_VERBOSE               - Verbose mode (see Verbose modes)
                                 Default: API_VERBOSE_NO      IN
   IPARM_DOF_NBR               - Degree of freedom per node
                                     Default: 1                    IN
   IPARM_ITERMAX               - Maximum iteration number for refinement
                           Default: 250                  IN
   IPARM_MATRIX_VERIFICATION   - Check the input matrix
                                      Default: API_NO               IN
   IPARM_MC64                  - MC64 operation <pastix.h> IGNORE
                                 Default: 0                    IN
   IPARM_ONLY_RAFF             - Refinement only
                                            Default: API_NO               IN
   IPARM_CSCD_CORRECT          - Indicate if the cscd has been redistributed
       after blend  Default: API_NO               IN
   IPARM_NBITER                - Number of iterations performed in refinement
             Default: -                    OUT
   IPARM_TRACEFMT              - Trace format (see Trace modes)
                                 Default: API_TRACE_PICL      IN
   IPARM_GRAPHDIST             - Specify if the given graph is distributed or
       not          Default: API_YES              IN
   IPARM_AMALGAMATION_LEVEL    - Amalgamation level
                                          Default: 5                    IN
   IPARM_ORDERING              - Choose ordering
                                            Default: API_ORDER_SCOTCH    IN
   IPARM_DEFAULT_ORDERING      - Use default ordering parameters with \scotch or
       \metis Default: API_YES              IN
   IPARM_ORDERING_SWITCH_LEVEL - Ordering switch level    (see \scotch User's
       Guide)    Default: 120                  IN
   IPARM_ORDERING_CMIN         - Ordering cmin parameter  (see \scotch User's
       Guide)    Default: 0                    IN
   IPARM_ORDERING_CMAX         - Ordering cmax parameter  (see \scotch User's
       Guide)    Default: 100000               IN
   IPARM_ORDERING_FRAT         - Ordering frat parameter  (see \scotch User's
       Guide)    Default: 8                    IN
   IPARM_STATIC_PIVOTING       - Static pivoting
                                            Default: -                    OUT
   IPARM_METIS_PFACTOR         - \metis pfactor
                                          Default: 0                    IN
   IPARM_NNZEROS               - Number of nonzero entries in the factorized
       matrix        Default: -                    OUT
   IPARM_ALLOCATED_TERMS       - Maximum memory allocated for matrix terms
                     Default: -                       OUT
   IPARM_BASEVAL               - Baseval used for the matrix
                        Default: 0                  IN
   IPARM_MIN_BLOCKSIZE         - Minimum block size
                                          Default: 60                   IN
   IPARM_MAX_BLOCKSIZE         - Maximum block size
                                          Default: 120                  IN
   IPARM_SCHUR                 - Schur mode
                                                Default: API_NO
```

```
                    IN
IPARM_ISOLATE_ZEROS          - Isolate null diagonal terms at the end of the
    matrix     Default: API_NO                IN
IPARM_RHSD_CHECK             - Set to API_NO to avoid RHS redistribution
                       Default: API_YES              IN
IPARM_FACTORIZATION          - Factorization mode (see Factorization modes)
                   Default: API_FACT_LDLT        IN
IPARM_NNZEROS_BLOCK_LOCAL    - Number of nonzero entries in the local block
    factorized matrix Default: -                     OUT
IPARM_CPU_BY_NODE            - Number of CPUs per SMP node
                                   Default: 0                    IN
IPARM_BINDTHRD               - Thread binding mode (see Thread binding modes)
                 Default: API_BIND_AUTO        IN
IPARM_THREAD_NBR             - Number of threads per MPI process
                              Default: 1                    IN
IPARM_DISTRIBUTION_LEVEL     - Distribution level IGNORE
                                    Default:                        IN
IPARM_LEVEL_OF_FILL          - Level of fill for incomplete factorization
                       Default: 1                    IN
IPARM_IO_STRATEGY            - IO strategy (see Checkpoints modes)
                           Default: API_IO_NO            IN
IPARM_RHS_MAKING             - Right-hand-side making (see Right-hand-side
    modes)       Default: API_RHS_B            IN
IPARM_REFINEMENT             - Refinement type (see Refinement modes)
                        Default: API_RAF_GMRES        IN
IPARM_SYM                    - Symmetric matrix mode (see Symmetric modes)
                    Default: API_SYM_YES          IN
IPARM_INCOMPLETE             - Incomplete factorization
                                  Default: API_NO               IN
IPARM_ABS                    - ABS level (Automatic Blocksize Splitting)
                      Default: 1                    IN
IPARM_ESP                    - ESP (Enhanced Sparse Parallelism)
                             Default: API_NO               IN
IPARM_GMRES_IM               - GMRES restart parameter
                                   Default: 25                   IN
IPARM_FREE_CSCUSER           - Free user CSC
                                                Default: API_CSC_PRESERVE
    IN
IPARM_FREE_CSCPASTIX         - Free internal CSC (Use only without call to
    Refin. step) Default: API_CSC_PRESERVE    IN
IPARM_OOC_LIMIT              - Out of core memory limit (Mo)
                                  Default: 2000                 IN
IPARM_OOC_THREAD             - Out of core thread number IGNORE
                             Default: 1                    IN
IPARM_OOC_ID                 - Out of core run ID         IGNORE
                             Default: -                    OUT
IPARM_NB_SMP_NODE_USED       - Number of SMP node used    IGNORE
                             Default:                      IN
IPARM_THREAD_COMM_MODE       - Threaded communication mode (see Communication
    modes)     Default: API_THREAD_MULT      IN
IPARM_NB_THREAD_COMM         - Number of thread(s) for communication
                          Default: 1                      IN
IPARM_FILL_MATRIX            - Initialize matrix coefficients (for test only)
     IGNORE    Default:                      IN
IPARM_INERTIA                - Return the inertia (symmetric matrix without
    pivoting)    Default: -                     OUT
IPARM_ESP_NBTASKS            - Return the number of tasks generated by ESP
                    Default: -                     OUT
IPARM_ESP_THRESHOLD          - Minimal block sizee to switch in ESP mode (128
    * 128)     Default: 16384                IN
IPARM_DOF_COST               - Degree of freedom for cost computation (If
    different from IPARM_DOF_NBR) Default: 0                    IN
IPARM_MURGE_REFINEMENT       - Enable refinement in MURGE
                                  Default: API_YES              IN
IPARM_STARPU                 - Use StarPU runtime
                                       Default: API_NO               IN
IPARM_AUTOSPLIT_COMM         - Automaticaly split communicator to have one MPI
     task by node              Default: API_NO               IN
IPARM_FLOAT                  - Indicate the floating point type  IGNORE
                      Default: -                     INOUT
IPARM_PID                    - Pid of the first process (used for naming the
    log directory) Default: -1                    OUT
IPARM_ERROR_NUMBER           - Return value
                                                Default: -
    OUT
IPARM_CUDA_NBR               - Number of cuda devices
                                    Default: 0                    IN
```

```
80    IPARM_TRANSPOSE_SOLVE        - Use transposed matrix during solve
                                 Default: API_NO              IN
      IPARM_STARPU_CTX_DEPTH       - Tree depth of the contexts given to StarPU
                        Default:3                        IN
82    IPARM_STARPU_CTX_NBR         - Number of contexts created
                                       Default:-1                    INOUT
      IPARM_PRODUCE_STATS          - Compute some statistiques (such as precision
          error)       Default:API_NO                IN
84    IPARM_GPU_CRITERIUM          - Criterium for sorting GPU
                                       Default:0                     IN
      IPARM_SIZE                   - Iparm Size                IGNORE
                                   Default:                     IN
86  }

88    IPARM_MODIFY_PARAMETER          = 0 ;
      IPARM_START_TASK                = 1 ;
90    IPARM_END_TASK                  = 2 ;
      IPARM_VERBOSE                   = 3 ;
92    IPARM_DOF_NBR                   = 4 ;
      IPARM_ITERMAX                   = 5 ;
94    IPARM_MATRIX_VERIFICATION       = 6 ;
      IPARM_MC64                      = 7 ;
96    IPARM_ONLY_RAFF                 = 8 ;
      IPARM_CSCD_CORRECT              = 9 ;
98    IPARM_NBITER                    = 10 ;
      IPARM_TRACEFMT                  = 11 ;
100   IPARM_GRAPHDIST                 = 12 ;
      IPARM_AMALGAMATION_LEVEL        = 13 ;
102   IPARM_ORDERING                  = 14 ;
      IPARM_DEFAULT_ORDERING          = 15 ;
104   IPARM_ORDERING_SWITCH_LEVEL     = 16 ;
      IPARM_ORDERING_CMIN             = 17 ;
106   IPARM_ORDERING_CMAX             = 18 ;
      IPARM_ORDERING_FRAT             = 19 ;
108   IPARM_STATIC_PIVOTING           = 20 ;
      IPARM_METIS_PFACTOR             = 21 ;
110   IPARM_NNZEROS                   = 22 ;
      IPARM_ALLOCATED_TERMS           = 23 ;
112   IPARM_BASEVAL                   = 24 ;
      IPARM_MIN_BLOCKSIZE             = 25 ;
114   IPARM_MAX_BLOCKSIZE             = 26 ;
      IPARM_SCHUR                     = 27 ;
116   IPARM_ISOLATE_ZEROS             = 28 ;
      IPARM_RHSD_CHECK                = 29 ;
118   IPARM_FACTORIZATION             = 30 ;
      IPARM_NNZEROS_BLOCK_LOCAL       = 31 ;
120   IPARM_CPU_BY_NODE               = 32 ;
      IPARM_BINDTHRD                  = 33 ;
122   IPARM_THREAD_NBR                = 34 ;
      IPARM_DISTRIBUTION_LEVEL        = 35 ;
124   IPARM_LEVEL_OF_FILL             = 36 ;
      IPARM_IO_STRATEGY               = 37 ;
126   IPARM_RHS_MAKING                = 38 ;
      IPARM_REFINEMENT                = 39 ;
128   IPARM_SYM                       = 40 ;
      IPARM_INCOMPLETE                = 41 ;
130   IPARM_ABS                       = 42 ;
      IPARM_ESP                       = 43 ;
132   IPARM_GMRES_IM                  = 44 ;
      IPARM_FREE_CSCUSER              = 45 ;
134   IPARM_FREE_CSCPASTIX            = 46 ;
      IPARM_OOC_LIMIT                 = 47 ;
136   IPARM_OOC_THREAD                = 48 ;
      IPARM_OOC_ID                    = 49 ;
138   IPARM_NB_SMP_NODE_USED          = 50 ;
      IPARM_THREAD_COMM_MODE          = 51 ;
140   IPARM_NB_THREAD_COMM            = 52 ;
      IPARM_FILL_MATRIX               = 53 ;
142   IPARM_INERTIA                   = 54 ;
      IPARM_ESP_NBTASKS               = 55 ;
144   IPARM_ESP_THRESHOLD             = 56 ;
      IPARM_DOF_COST                  = 57 ;
146   IPARM_MURGE_REFINEMENT          = 58 ;
      IPARM_STARPU                    = 59 ;
148   IPARM_AUTOSPLIT_COMM            = 60 ;
      IPARM_FLOAT                     = 61 ;
150   IPARM_PID                       = 62 ;
```

```
  IPARM_ERROR_NUMBER              = 63 ;
  IPARM_CUDA_NBR                  = 64 ;
  IPARM_TRANSPOSE_SOLVE           = 65 ;
  IPARM_STARPU_CTX_DEPTH          = 66 ;
  IPARM_STARPU_CTX_NBR            = 67 ;
  IPARM_PRODUCE_STATS             = 68 ;
  IPARM_GPU_CRITERIUM             = 69 ;
  IPARM_SIZE                      = 128 ;  { Need to be greater or equal to 64 for
      backward compatibility }

{ Acces au tableau dparm }
{
   Enum: DPARM_ACCESS

   Floating point parameters tabular accessors

   DPARM_FILL_IN             - Fill-in
       Default: -                OUT
   DPARM_MEM_MAX             - Maximum memory (-DMEMORY_USAGE)
       Default: -                OUT
   DPARM_EPSILON_REFINEMENT  - Epsilon for refinement
       Default: 1e^(-12)         IN
   DPARM_RELATIVE_ERROR      - Relative backward error
       Default: -                OUT
   DPARM_EPSILON_MAGN_CTRL   - Epsilon for magnitude control
       Default: 1e^(-31)         IN
   DPARM_ANALYZE_TIME        - Time for Analyse step (wallclock)
       Default: -                OUT
   DPARM_PRED_FACT_TIME      - Predicted factorization time
       Default: -                OUT
   DPARM_FACT_TIME           - Time for Numerical Factorization step (wallclock)
       Default: -                OUT
   DPARM_SOLV_TIME           - Time for Solve step (wallclock)
       Default: -                OUT
   DPARM_FACT_FLOPS          - Numerical Factorization flops (rate!)
       Default: -                OUT
   DPARM_SOLV_FLOPS          - Solve flops (rate!)
       Default: -                OUT
   DPARM_RAFF_TIME           - Time for Refinement step (wallclock)
       Default: -                OUT
   DPARM_SIZE                - Dparm Size          IGNORE
       Default: -                IN
 }

  DPARM_FILL_IN                   = 1 ;
  DPARM_MEM_MAX                   = 2 ;
  DPARM_EPSILON_REFINEMENT        = 5 ;
  DPARM_RELATIVE_ERROR            = 6 ;
  DPARM_SCALED_RESIDUAL           = 7 ;
  DPARM_EPSILON_MAGN_CTRL         = 10 ;
  DPARM_ANALYZE_TIME              = 18 ;
  DPARM_PRED_FACT_TIME            = 19 ;
  DPARM_FACT_TIME                 = 20 ;
  DPARM_SOLV_TIME                 = 21 ;
  DPARM_FACT_FLOPS                = 22 ;
  DPARM_SOLV_FLOPS                = 23 ;
  DPARM_RAFF_TIME                 = 24 ;
  DPARM_SIZE                      = 64 ; { Need to be greater or equal to 64 for
      backward compatibility }

{* Etapes de resolution de PaStiX }
{
  Enum: API_TASK

  PaStiX step modes (index IPARM_START_TASK and IPARM_END_TASK)

  API_TASK_INIT       - Set default parameters
  API_TASK_ORDERING   - Ordering
  API_TASK_SYMBFACT   - Symbolic factorization
  API_TASK_ANALYSE    - Tasks mapping and scheduling
  API_TASK_NUMFACT    - Numerical factorization
  API_TASK_SOLVE      - Numerical solve
  API_TASK_REFINE     - Numerical refinement
  API_TASK_CLEAN      - Clean
 }
{ _POS_ 1 }

```

```
  API_TASK_INIT        = 0 ;
  API_TASK_ORDERING    = 1 ;
  API_TASK_SYMBFACT    = 2 ;
  API_TASK_ANALYSE     = 3 ;
  API_TASK_NUMFACT     = 4 ;
  API_TASK_SOLVE       = 5 ;
  API_TASK_REFINE      = 6 ;
  API_TASK_CLEAN       = 7 ;

{* Affichage de PaStiX }
{
   Enum: API_VERBOSE

   Verbose modes (index IPARM_VERBOSE)

   API_VERBOSE_NOT         - Silent mode ; no messages
   API_VERBOSE_NO          - Some messages
   API_VERBOSE_YES         - Many messages
   API_VERBOSE_CHATTERBOX - Like a gossip
   API_VERBOSE_UNBEARABLE - Really talking too much...
}
{ _POS_ 5 }

  API_VERBOSE_NOT         = 0 ; { Nothing  }
  API_VERBOSE_NO          = 1 ; { Default  }
  API_VERBOSE_YES         = 2 ; { Extended }
  API_VERBOSE_CHATTERBOX = 3 ;
  API_VERBOSE_UNBEARABLE = 4 ;

{* Load strategy for graph and ordering }
{
  Enum: API_IO

  Check-points modes (index IPARM_IO)

  API_IO_NO          - No output or input
  API_IO_LOAD        - Load ordering during ordering step and symbol matrix
      instead of symbolic factorisation.
  API_IO_SAVE        - Save ordering during ordering step and symbol matrix
      instead of symbolic factorisation.
  API_IO_LOAD_GRAPH - Load graph during ordering step.
  API_IO_SAVE_GRAPH - Save graph during ordering step.
  API_IO_LOAD_CSC    - Load CSC(d) during ordering step.
  API_IO_SAVE_CSC    - Save CSC(d) during ordering step.
 }
{ _POS_ 6 }

  API_IO_NO          = 0 ;
  API_IO_LOAD        = 1 ;
  API_IO_SAVE        = 2 ;
  API_IO_LOAD_GRAPH = 4 ;
  API_IO_SAVE_GRAPH = 8 ;
  API_IO_LOAD_CSC    = 16 ;
  API_IO_SAVE_CSC    = 32 ;

{* Generation du second membre }
{
  Enum: API_RHS

  Right-hand-side modes (index IPARM_RHS)

  API_RHS_B - User's right hand side
  API_RHS_1 - $ \forall i ; X_i = 1 $
  API_RHS_I - $ \forall i ; X_i = i $

 }
{ _POS_ 7 }

  API_RHS_B = 0 ; { Utilisation du second membre fournit }
  API_RHS_1 = 1 ; { Utilisation d'un second membre dont tous les coefficients
      valent 1 }
  API_RHS_I = 2 ; { Utilisation d'un second membre tel que RHS(i) = i }
  API_RHS_0 = 3 ; { Initialisation en mode ONLY_RAFF d'une solution X0(i) = 0 }

{* Type de raffinement utilise }
{
  Enum: API_RAF
```

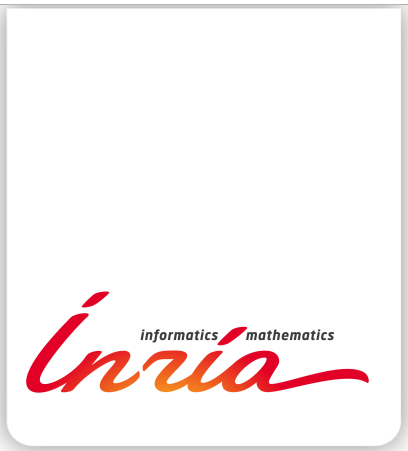
```
288   Refinement modes (index IPARM_REFINEMENT)

290   API_RAF_GMRES    - GMRES
      API_RAF_GRAD     - Conjugate Gradient ($LL^t$ or $LDL^t$ factorization)
292   API_RAF_PIVOT    - Iterative Refinement (only for $LU$ factorization)
      API_RAF_BICGSTAB - BICGSTAB
294  }
     { _POS_ 8 }
296
      API_RAF_GMRES    = 0 ; { Utilisation de GMRES }
298   API_RAF_GRAD     = 1 ; { Utilisation du gradient conjugue }
      API_RAF_PIVOT    = 2 ; { Utilisation de la methode du pivot }
300   API_RAF_BICGSTAB = 3 ;

302  {* Type de facto utilisee (LLT ;LDLT ;LU)}
     {
304   Enum: API_FACT

306   Factorization modes (index IPARM_FACTORISATION)

308   API_FACT_LLT  - $LL^t$ Factorization
      API_FACT_LDLT - $LDL^t$ Factorization
310   API_FACT_LU   - $LU$ Factorization
      API_FACT_LDLH - $LDL^h$ hermitian factorization
312  }
     { _POS_ 4 }
314
      API_FACT_LLT  = 0 ; { Factorisation de Cholesky }
316   API_FACT_LDLT = 1 ; { Factorisation de Crout }
      API_FACT_LU   = 2 ; { Factorisation LU }
318   API_FACT_LDLH  = 3 ;

320  {* Matrice symetrique ou non (0 : symetrique ; 1 : non) }
     {
322   Enum: API_SYM

324   Symmetric modes (index IPARM_SYM)

326   API_SYM_YES - Symmetric matrix
      API_SYM_NO  - Nonsymmetric matrix
328   API_SYM_HER - Hermitian

330  }
     { _POS_ 3 }
332
      API_SYM_YES = 0 ; { Matrice symetrique     }
334   API_SYM_NO  = 1 ;  { Matrice non symetrique }
      API_SYM_HER = 2 ;
336
     {* Supressing user CSC(D) when not usefull anymore }
338  {
      Enum: API_ERASE_CSC
340
      CSC Management modes (index IPARM_FREE_CSCUSER and IPARM_FREE_CSCPASTIX)
342
      API_CSC_PRESERVE - Do not free the CSC
344   API_CSC_FREE     - Free the CSC when no longer needed
     }
346  { _POS_ 11 }

348   API_CSC_PRESERVE = 0 ;
      API_CSC_FREE     = 1 ;
350
     {* DMP communication mode }
352  {
      Enum: API_THREAD_MODE
354
      Comunication modes (index IPARM_THREAD_COMM_MODE)
356
      API_THREAD_MULTIPLE      - All threads communicate.
358   API_THREAD_FUNNELED      - One thread perform all the MPI Calls.
      API_THREAD_COMM_ONE      - One dedicated communication thread will receive
          messages.
360   API_THREAD_COMM_DEFINED  - Then number of threads receiving the messages is
          given by IPARM_NB_THREAD_COMM.
      API_THREAD_COMM_NBPROC   - One communication thread per computation thread
```

```
      will receive messages.
 }
{ _POS_ 9 }

  API_THREAD_MULTIPLE      = 1 ;
  API_THREAD_FUNNELED      = 2 ;
  API_THREAD_COMM_ONE      = 4 ;
  API_THREAD_COMM_DEFINED  = 8 ;
  API_THREAD_COMM_NBPROC   = 16 ;

{* Thread binding }
{
  Enum: API_BIND_MODE

  Thread-binding modes (index IPARM_BINTHRD)

  API_BIND_NO   - Do not bind thread
  API_BIND_AUTO - Default binding
  API_BIND_TAB  - Use vector given by pastix_setBind
}
{ _POS_ 12 }

  API_BIND_NO      = 0 ; { Do not bind threads                          }
  API_BIND_AUTO    = 1 ; { Default thread binding                       }
  API_BIND_TAB     = 2 ; { Use tabular given by pastix_setBind to bind }

{* Boolean }
{
  Enum: API_BOOLEAN

  Boolean modes (All boolean except IPARM_SYM)

  API_NO  - No
  API_YES - Yes
 }
{ _POS_ 2 }

  API_NO  = 0 ;
  API_YES = 1 ;

{* Trace format }
{
  Enum: API_TRACEFMT

  Trace modes (index IPARM_TRACEFMT)

  API_TRACE_PICL       - Use PICL trace format
  API_TRACE_PAJE       - Use Paje trace format
  API_TRACE_HUMREAD    - Use human-readable text trace format
  API_TRACE_UNFORMATED - Unformated trace format
 }
{ _POS_ 10 }

  API_TRACE_PICL       = 0 ; { Use PICL trace format       }
  API_TRACE_PAJE       = 1 ; { Use Paje trace format       }
  API_TRACE_HUMREAD    = 2 ; { Use text trace format       }
  API_TRACE_UNFORMATED = 3 ; { Use unformated trace format }

{
  Enum: API_ORDER

  Ordering modes (index IPARM_ORDERING)

  API_ORDER_SCOTCH    - Use \scotch ordering
  API_ORDER_METIS     - Use \metis ordering
  API_ORDER_PERSONAL - Apply user's permutation
  API_ORDER_LOAD      - Load ordering from disk
 }
{ _POS_ 11 }

  API_ORDER_SCOTCH     = 0 ;
  API_ORDER_METIS      = 1 ;
  API_ORDER_PERSONAL   = 2 ;
  API_ORDER_LOAD       = 3 ;

{
  Enum: API_FLOAT
```

```
438
   Ordering modes (index IPARM_ORDERING)
440
   API_REALSINGLE     - Use \scotch ordering
442  API_REALDOUBLE     - Use \metis ordering
   API_COMPLEXSINGLE - Apply user's permutation
444  API_COMPLEXDOUBLE - Load ordering from disk
  }
446 { _POS_ 61 }

448  API_REALSINGLE     = 0 ;
   API_REALDOUBLE     = 1 ;
450  API_COMPLEXSINGLE = 2 ;
   API_COMPLEXDOUBLE = 3 ;
452
  {
454  * Enum: API_GPU_CRITERIUM
  *
456  * Criterium used to decide to put tasks on GPUs.
  *
458  * API_GPU_CRITERION_UPDATES  - Number of updates on the panel.
  * API_GPU_CRITERION_CBLKSIZE - Size of the target panel.
460  * API_GPU_CRITERION_FLOPS    - Number of FLOP involved in updates.
  * API_GPU_CRITERION_PRIORITY - Priority computed in static scheduler.
462  }

464  API_GPU_CRITERION_UPDATES  = 0 ;
   API_GPU_CRITERION_CBLKSIZE = 1 ;
466  API_GPU_CRITERION_FLOPS    = 2 ;
   API_GPU_CRITERION_PRIORITY = 3 ;
468
  {
470  Enum: MODULES

472  Module Identification number.

474  If an error occurs ; error value is set to
   MODULE + EER_NUMBER.
476
   User can catch error by computing iparm[IPARM_ERROR_NUMBER]%100.
478
   MODULE can be catch by computing iparm[IPARM_ERROR_NUMBER] - iparm[
       IPARM_ERROR_NUMBER]%100.
480
   MOD_UNKNOWN - Unknown module
482  MOD_SOPALIN - Numerical factorisation module
   MOD_BLEND   - Analysing module
484  MOD_SCOTCH  - Scotch module
   MOD_FAX     - Symbolic factorisation module
486  MOD_ORDER   - Order module
   MOD_COMMON  - Common module
488  MOD_SI      -
   MOD_GRAPH   - Graph module
490  MOD_SYMBOL  - Symbol structure module
   MOD_KASS    - Kass module
492  MOD_BUBBLE  - Bubble
   MOD_MURGE   - Murge
494
  }
496
   MOD_UNKNOWN =    0 ;
498  MOD_SOPALIN =  100 ;
   MOD_BLEND   =  200 ;
500  MOD_SCOTCH  =  300 ;
   MOD_FAX     =  400 ;
502  MOD_ORDER   =  500 ;
   MOD_COMMON  =  600 ;
504  MOD_SI      =  700 ;
   MOD_GRAPH   =  800 ;
506  MOD_SYMBOL  =  900 ;
   MOD_KASS    = 1000 ;
508  MOD_BUBBLE  = 1100 ;
   MOD_MURGE   = 1200 ;
510
  { Enum: ERR_NUMBERS
512
    Error Numbers
```

```
514
   NO_ERR              - No error
516   UNKNOWN_ERR         - Unknown error
   ALLOC_ERR           - Allocation error
518   ASSERT_ERR          - Error in one assertion
   NOTIMPLEMENTED_ERR - Not implemented feature
520   OUTOFMEMORY_ERR     - Not enough memory (OOC)
   THREAD_ERR          - Error with threads
522   INTERNAL_ERR        - Internal error
   BADPARAMETER_ERR    - Bad parameters given
524   FILE_ERR            - Error in In/Out operations
   BAD_DEFINE_ERROR    - Error with defines during compilation
526   INTEGER_TYPE_ERR    - Error with integer types
   IO_ERR              - Error with input/output
528   MATRIX_ERR          - Wrongly defined matrix
   FLOAT_TYPE_ERR      - Wrong type of floating point values
530   STEP_ORDER_ERR      - Error in ordering
   MPI_ERR             - Error with MPI calls
532 }
   { Need to conserve it MURGE compliant }
534
  NO_ERR              = 0 ;
536   UNKNOWN_ERR         = 1 ;
   ALLOC_ERR           = 2 ;
538   ASSERT_ERR          = 3 ;
   NOTIMPLEMENTED_ERR = 4 ;
540   OUTOFMEMORY_ERR     = 5 ;
   THREAD_ERR          = 6 ;
542   INTERNAL_ERR        = 7 ;
   BADPARAMETER_ERR    = 8 ;
544   FILE_ERR            = 9 ;
   BAD_DEFINE_ERR      = 10 ;
546   INTEGER_TYPE_ERR    = 11 ;
   IO_ERR              = 12 ;
548   MATRIX_ERR          = 13 ;
   FLOAT_TYPE_ERR      = 14 ;
550   STEP_ORDER_ERR      = 15 ;
   MPI_ERR             = 16 ;
552
   procedure z_pastix(pastix_data: Pointer;
554                      mpi_comm: Integer;
                      n: Integer;
556                      colptr: TArray<Integer>;
                      rows: TArray<Integer>;
558                      values: TArray<Complexe>;
                      perm: TArray<Integer>;
560                      invp: TArray<Integer>;
                      rhs: TArray<Complexe>;
562                      nrhs: Integer;
                      iparm: TArray<Integer>;
564                      dparm: TArray<Double>);
                      cdecl; external 'libpastix';
566
   function z_pastix_checkMatrix_2steps(data_check: pointer;
568                                        pastix_comm: integer;
                                        verb : integer;
570                                        flagsym : integer;
                                        flagcor : integer;
572                                        n : integer ;
                                        colptr : TArray<Integer> ;
574                                        row : TArray<integer> ;
                                        avals : TArray<complexe> ;
576                                        loc2glob : pointer ;
                                        dof : integer) : integer ;
578                                        cdecl ; external 'libpastix';
580   procedure z_pastix_checkMatrix_2steps_end(data_check : pointer ;
                                             verb : integer ;
582                                             row : TArray<integer> ;
                                             avals : TArray<complexe> ;
584                                             dof : integer) ;
                                             cdecl ; external 'libpastix';
586
   procedure openblas_set_num_threads(nblas : integer); cdecl; external '
       libopenblas';
588
   implementation
```

```
590
end .
```



RESEARCH CENTRE
BORDEAUX – SUD-OUEST

200 avenue de la Vieille Tour
33405 Talence Cedex

Publisher
Inria
Domaine de Voluceau - Rocquencourt
BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex
inria.fr

ISSN 0249-0803